

БАГАТОПАРАМЕТРИЧНА ДІАГНОСТИКА ХАРАКТЕРИСТИК МІКРОДЕФЕКТІВ НА ОСНОВІ ЕВРИСТИЧНОЇ МОДЕЛІ ДЕФОРМАЦІЙНИХ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ ПОВНОЇ ІНТЕГРАЛЬНОЇ ІНТЕНСИВНОСТІ

М. С. Брюхаська^{1, а}, А. А. Катасонов¹, А. І. Низкова², В. В. Лізунов², О. С. Кононенко²,
В. Б. Молодкін²

¹Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,
Фізико-технічний інститут

²Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

Анотація

Робота присвячена вивченню діагностичних можливостей метода деформаційних залежностей (ДЗ) повної інтегральної інтенсивності динамічної дифракції (ПІДД) для монокристалів із хаотично розподіленими мікродефектами. Показано, що в разі, коли дифузна складова ПІДД порівнянна з її когерентною складовою, або істотно перевищує її, то ДЗ ПІДД мають унікальну чутливість до мікродефектів в монокристалах, що дає високу інформативність для визначення характеристик мікродефектів.

Ключові слова: інтегральна динамічна дифрактометрія, дифузне розсіювання, мікродефекти

Вступ

На даний час є актуальним питання розробки підходу для діагностики недосконалостей монокристалів не руйнуючим методом ДЗ ПІДД на основі евристичної моделі, яка була запропонована у роботах [1, 2], та справедлива у випадках, коли дифузна складова ПІДД може бути порівнянною з її когерентною складовою, або значно перевищувати її.

В даній роботі було досліджено вплив різних умов дифракційного експерименту, зокрема, довжини хвилі випромінювання та різних областей деформації, що дає можливим визначати як параметри дефектної структури, так і необхідні характеристики ДЗ, що змінюються за рахунок дефектів.

В результаті була проведена діагностика характеристик дефектів хаотично розподілених у кристалі кремнію на основі запропонованої моделі методом ДЗ ПІДД за відсутності сьогодні точної теоретичної моделі, потрібної для цього випадку, але без використання при цьому еталонних зразків. Таким чином була доведена можливість визначення характеристик декількох типів мікродефектів шляхом використання ДЗ ПІДД.

1. Теоретична модель

У роботах [1, 2] була побудована напівфенологічна модель ДЗ ПІДД для діагностики параметрів

структурних дефектів у вигнутих кристалах з дефектами, та загальний вираз для ПІДД має вигляд:

$$R_{ib} = R_{icoh} (1 + \alpha BT + \beta B^2 T^2) \cdot \exp \left[-\gamma \frac{M_0^\delta}{r^\delta} \right] + \\ + R_{id} (1 + \alpha' BT) \cdot \exp \left[-\gamma' \frac{M_0^\delta}{r^\delta} \right], \quad (1)$$

де множники R_{ic} та R_{id} описують когерентну та дифузну складові повної інтегральної інтенсивності динамічної дифракції недеформованого кристалу, r – радіус кривизни пружного вигину, $D = BT$ – ефективна деформація, $\beta = \gamma_0 / \gamma_1$, ψ – кут між поверхнею відбиття та нормаллю до поверхні кристала, λ – довжина хвилі рентгенівського випромінювання, $\gamma_0 = \cos(\theta_B + \psi)$, $\gamma_1 = \cos(\theta_B - \psi)$, θ_B – кут Бреґґа, ν – коефіцієнт Пуассона, χ_{Hr} – реальна частина Фур'є-компоненти поляризованості кристала, χ_{i0} – уявна частина Фур'є-компоненти поляризованості кристала, C – поляризаційний множник, $d = a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$, a – стала ґратиці, h, k, l – індекси Мілера, t – товщина кристала [1, 2].

У даній роботі пропонується підхід, який не потребує попередніх експериментів для еталонних зразків, крім досліджуваного зразка. Даний підхід полягає в варіюванні умов дифракції і областей деформації. Цього виявляється достатнім, щоб визначати як параметри дефектної структури, так і необхідні характеристики деформаційної залежності, які змінюються за рахунок дефектів.

^аmania11@ukr.net

Для реалізації запропонованого підходу спочатку необхідно визначити коефіцієнти $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ для ідеального кристала, методом, аналогічним використаному в роботі [1]. Значення цих коефіцієнтів підбираються шляхом підгонки розрахованих за моделлю (1) залежностей до теоретичних ДЗ ПДД для пружно вигнутого кристала, що не містить мікродфектів [3], [4]. Підгонка ДЗ проводиться для (220) $MoK\alpha$ і для (220) $CuK\alpha$ -лауе-рефлексів рентгенівського випромінювання для зразка кремнію, який було відпалено при $t = 1000^\circ C$ протягом 20 годин.

Результати підгонки для різних інтервалів зміни ефективної деформації, а також значення коефіцієнта добротності підгонки представлені на рис. 1.

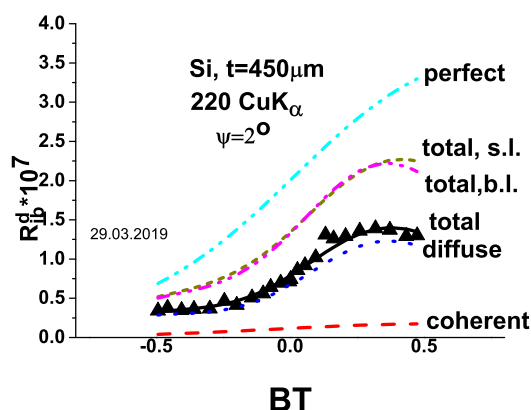


Рис. 1. Лінії розраховані за моделлю (1). При цьому $\alpha'/\alpha = 1.74$, $\beta'/\beta = 6.6$, $\gamma'/\gamma = 5.2$, $\eta' = 0.025 \cdot 10^6 \text{мкм}$, $\mu_{ds} = 0.00424 \text{мкм}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0 = 0.297$), $\mu^* = 0.00162 \text{мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0.1138$). КДП = 0.460. $R_{b.l.} = 2.5 \text{мкм}$, $c_{b.l.}/v_c = 1.19 \cdot 10^{-16}$ ($c_{b.l.} = 5.96 \cdot 10^8 \text{см}^{-3}$), $R_{sm.l.} = 0.027 \text{мкм}$, $c_{mn}/v_c = 1.74 \cdot 10^{-9}$ ($c_{sm.l.} = 8.7 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$)

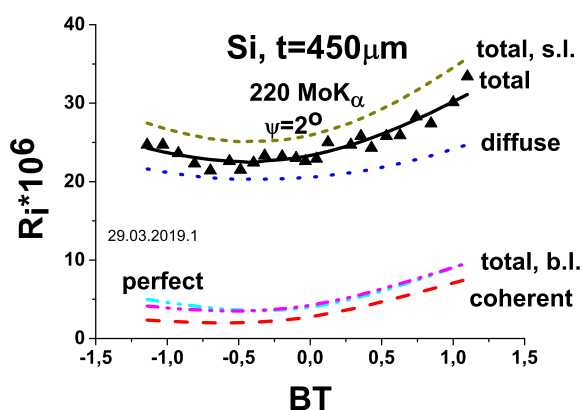


Рис. 2. Лінії розраховані за моделлю (1). При цьому $\alpha'/\alpha = 0.11$, $\beta'/\beta = 0.125$, $\gamma'/\gamma = 1.1$, $L = 0.0401$, $\mu_{ds} = 0.00114 \text{мкм}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0 = 0.8017$), $\mu^* = 0.000402 \text{мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0.2827$). КДП = 0.460. Див. підпис до рис. 1

Лінії на рис. 1 та рис.2: perfect – розрахунок за теорією для пружно вигнутого кристала без дефектів, total, s.l., и total b.l. – лінії отримані за моделлю (1) із врахуванням присутності маленьких або великих дислокаційних петель відповідно, total – розрахунок ПДД за моделлю із врахуванням присутності великих та маленьких дислокаційних петель одночасно, трикутні маркери – данні з експерименту, diffuse и coherent – дифузна та когерентна складові ПДД.

Висновки

Була проведена багатопараметрична діагностика характеристик мікродфектів за допомогою евристичної моделі ДЗ ПДД у кристалах з дефектами без додаткових вимірювань на еталонних кристалах кремнію із використанням декількох відображень в наближеннях тонкого і товстого кристалів. Можливість вказаної діагностики досягається за рахунок використання фазоваріаційного підходу, що складається в даному випадку в цілеспрямованому варіюванні умов дифракції і областей деформації. Цього виявляється достатнім, щоб визначати параметри дефектної структури.

Таким чином, доведена можливість визначення шляхом використання ДЗ ПДД характеристик декількох типів мікродфектів.

Перелік використаних джерел

1. Models of Deformation Dependences of Total Integrated Intensity of Dynamical Diffraction in Single Crystals for Various Diffraction Conditions / S. M. Brovchuk, V. B. Molodkin, A. I. Nizkova и др. // Металлофиз. новейшие технол. — 2014. — Т. 36, № 8. — С. 1035.
2. Явление усиления на порядки величины проявления дефектов в картине многократного рассеяния и его дисперсионная природа / В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова и др. // Металлофиз. новейшие технол. — 2014. — Т. 36, № 7. — С. 857–870.
3. Чуховский Ф. Н. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в упруго изогнутых кристаллах. Лауэ-дифракция // Металлофизика. — 1980. — Т. 2, № 6. — С. 3–27.
4. Чуховский Ф. Н. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в упруго изогнутых кристаллах. Брэгг-дифракция // Металлофизика. — 1981. — Т. 3, № 5. — С. 3–29.